

Methode der kleinsten Quadrate mit reduziertem Rang

Christian Mikulcak

Mathematical Image Analysis Group
Saarland University

2. Dezember 2015

Motivation

Betrachte das Problem :

$$b = Ax + \eta, \quad A \in \mathbb{R}^{m \times n}$$

Nicht immer Interesse an der Lösung x des Problems,
sondern:

$$\|A\hat{x} - b\|_2 / \|b\|_2 \quad (\text{Relatives Residuum})$$

Motivation

Wir betrachten :

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1,00001 \\ 1 & 1 & 2,00003 \\ 1 & 1 & 2,00002 \end{pmatrix}$$

Motivation

Wir betrachten :

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1,00001 \\ 1 & 1 & 2,00003 \\ 1 & 1 & 2,00002 \end{pmatrix}$$

⇒ Schlecht gestellte Matrix, hohe Konditionszahl.

Motivation

Wir betrachten :

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1,00001 \\ 1 & 1 & 2,00003 \\ 1 & 1 & 2,00002 \end{pmatrix}$$

⇒ Schlecht gestellte Matrix, hohe Konditionszahl.

$$\kappa = \|A\| \cdot \|A^{-1}\| = 1,62006 * 10^8$$

Motivation

Wir betrachten :

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1,00001 \\ 1 & 1 & 2,00003 \\ 1 & 1 & 2,00002 \end{pmatrix}$$

⇒ Schlecht gestellte Matrix, hohe Konditionszahl.

$$\kappa = \|A\| \cdot \|A^{-1}\| = 1,62006 * 10^8$$

⇒ Sehr anfällig für Fehler

Outline

■ Reduzierter Rang?

Outline

■ Reduzierter Rang?

Suche eine Basis Z_k und löse: $\min_y \|AZ_k y - b\|_2$

Outline

- Reduzierter Rang?

Suche eine Basis Z_k und löse: $\min_y \|AZ_k y - b\|_2$

- Wie finde ich eine solche Basis?

Outline

- Reduzierter Rang?

Suche eine Basis Z_k und löse: $\min_y \|AZ_k y - b\|_2$

- Wie finde ich eine solche Basis?

- Abgeschnittene Singulärwertzerlegung

Outline

- Reduzierter Rang?

Suche eine Basis Z_k und löse: $\min_y \|AZ_k y - b\|_2$

- Wie finde ich eine solche Basis?

- Abgeschnittene Singulärwertzerlegung
- Bidiagonalisierung

Outline

- Reduzierter Rang?

Suche eine Basis Z_k und löse: $\min_y \|AZ_k y - b\|_2$

- Wie finde ich eine solche Basis?

- Abgeschnittene Singulärwertzerlegung

- Bidiagonalisierung

- Householder

Outline

- Reduzierter Rang?

Suche eine Basis Z_k und löse: $\min_y \|AZ_k y - b\|_2$

- Wie finde ich eine solche Basis?

- Abgeschnittene Singulärwertzerlegung

- Bidiagonalisierung

- Householder

- Lanczos-Golub-Kahan

Outline

- Reduzierter Rang?

Suche eine Basis Z_k und löse: $\min_y \|AZ_k y - b\|_2$

- Wie finde ich eine solche Basis?

- Abgeschnittene Singulärwertzerlegung

- Bidiagonalisierung

- Householder

- Lanczos-Golub-Kahan

- Bidiagonalisierung → Norm ?

Reduzierter Rang

Unser Problem

$Ax = b$ und A hat vollen Rang,
aber große **Konditionszahl**.

Wir wollen das Problem besser konditionieren:

- ⇒ Verringere den Rang der Matrix durch eine Basis Z_k
- ⇒ Löse nun : $\min_y \|AZ_k y - b\|_2$

Methoden zur Aufstellung von Z_k

Wie finde ich eine solche Basis?

Abgeschnittene Singulärwertzerlegung

Singulärwertzerlegung : → letzte Woche

Abgeschnittene Singulärwertzerlegung

Singulärwertzerlegung : → letzte Woche

$$A = U\Sigma V^T = \sum_{i=1}^r \sigma_i u_i v_i^T$$

Es gilt:

$$\min_x \|Ax - b\| \text{ wird minimiert für } x = \sum_{i=1}^r \frac{u_i^T b}{\sigma_i} v_i$$

Abgeschnittene Singulärwertzerlegung

Wir wählen :

$$Z_k = V_k = (v_1 \ v_2 \ \dots \ v_k)$$

und berechnen :

$$\|AV_k y - b\|_2^2 =$$

Abgeschnittene Singulärwertzerlegung

Wir wählen :

$$\mathbf{Z}_k = \mathbf{V}_k = (v_1 \ v_2 \ \dots \ v_k)$$

und berechnen :

$$\begin{aligned} \|\mathbf{A}\mathbf{V}_k\mathbf{y} - \mathbf{b}\|_2^2 &= \left\| \begin{pmatrix} \sigma_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \sigma_k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_k \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} u_1^T \mathbf{b} \\ \vdots \\ u_k^T \mathbf{b} \end{pmatrix} \right\|_2^2 \\ &\quad + \sum_{i=k+1}^r (u_i^T \mathbf{b})^2 \end{aligned}$$

Abgeschnittene Singulärwertzerlegung

Wir wählen :

$$\mathbf{Z}_k = \mathbf{V}_k = (v_1 \ v_2 \ \dots \ v_k)$$

und berechnen :

$$\begin{aligned} \|\mathbf{A}\mathbf{V}_k\mathbf{y} - \mathbf{b}\|_2^2 &= \left\| \begin{pmatrix} \sigma_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \sigma_k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_k \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} u_1^T \mathbf{b} \\ \vdots \\ u_k^T \mathbf{b} \end{pmatrix} \right\|_2^2 \\ &\quad + \sum_{i=k+1}^r (u_i^T \mathbf{b})^2 \end{aligned}$$

Also hat unser Problem $\min_{\mathbf{y}} \|\mathbf{A}\mathbf{V}_k\mathbf{y} - \mathbf{b}\|_2$ die Lösung :

$$\mathbf{x}_k := \sum_{i=1}^k \frac{u_i^T \mathbf{b}}{\sigma_i} \mathbf{v}_i$$

Methoden zur Aufstellung von Z_k

Haben wir jetzt die Basis gefunden?

Methoden zur Aufstellung von Z_k

Haben wir jetzt die Basis gefunden?

⇒ **Noch nicht!**

Methoden zur Aufstellung von Z_k

Haben wir jetzt die Basis gefunden?

⇒ **Noch nicht!**

⇒ Es fehlt eine Methode um V_k aufzustellen.

Bidiagonale Matrix

Durch Householder Transformationen erreichen wir :

$$H^T C W = \begin{pmatrix} x & x & & & \\ & x & x & & \\ & & x & x & \\ & & & x & x \\ & & & & x \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{B} \\ 0 \end{pmatrix}$$

mit $H = H_1 H_2 \cdots H_n$ und $W = W_1 W_2 \cdots W_{n-2}$

Bidiagonales Problem der kleinsten Quadrate

Mit $h_1 = \beta_1 c_1$ und $W = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & Z \end{pmatrix}$ können wir folgendes erreichen :

$$H^T C W =$$

Bidiagonales Problem der kleinsten Quadrate

Mit $h_1 = \beta_1 c_1$ und $W = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & Z \end{pmatrix}$ können wir folgendes erreichen :

$$H^T C W = H^T (b \quad A) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & Z \end{pmatrix} =$$

Bidiagonales Problem der kleinsten Quadrate

Mit $h_1 = \beta_1 c_1$ und $W = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & Z \end{pmatrix}$ können wir folgendes erreichen :

$$H^T C W = H^T (b \quad A) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & Z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} H^T b & H^T A Z \end{pmatrix} =$$

Bidiagonales Problem der kleinsten Quadrate

Mit $h_1 = \beta_1 c_1$ und $W = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & Z \end{pmatrix}$ können wir folgendes erreichen :

$$H^T C W = H^T (b \ A) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & Z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} H^T b & H^T A Z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \beta_1 e_1 & B \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Bidiagonales Problem der kleinsten Quadrate

Mit $h_1 = \beta_1 c_1$ und $W = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & Z \end{pmatrix}$ können wir folgendes erreichen :

$$H^T C W = H^T (b \ A) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & Z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} H^T b & H^T A Z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \beta_1 e_1 & B \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

und damit unsere Norm umschreiben :

$$\|b - Ax\|_2 =$$

Bidiagonales Problem der kleinsten Quadrate

Mit $h_1 = \beta_1 c_1$ und $W = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & Z \end{pmatrix}$ können wir folgendes erreichen :

$$H^T C W = H^T (b \ A) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & Z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} H^T b & H^T A Z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \beta_1 e_1 & B \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

und damit unsere Norm umschreiben :

$$\|b - Ax\|_2 = \left\| (b \ A) \begin{pmatrix} 1 \\ -x \end{pmatrix} \right\|_2$$

Bidiagonales Problem der kleinsten Quadrate

Mit $h_1 = \beta_1 c_1$ und $W = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & Z \end{pmatrix}$ können wir folgendes erreichen :

$$H^T C W = H^T (b \ A) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & Z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} H^T b & H^T A Z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \beta_1 e_1 & B \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

und damit unsere Norm umschreiben :

$$\|b - Ax\|_2 = \left\| (b \ A) \begin{pmatrix} 1 \\ -x \end{pmatrix} \right\|_2 = \left\| H^T (b \ A) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & Z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ -y \end{pmatrix} \right\|_2$$

Bidiagonales Problem der kleinsten Quadrate

Mit $h_1 = \beta_1 c_1$ und $W = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & Z \end{pmatrix}$ können wir folgendes erreichen :

$$H^T C W = H^T (b \ A) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & Z \end{pmatrix} = (H^T b \ H^T A Z) = \begin{pmatrix} \beta_1 e_1 & B \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

und damit unsere Norm umschreiben :

$$\begin{aligned} \|b - Ax\|_2 &= \left\| (b \ A) \begin{pmatrix} 1 \\ -x \end{pmatrix} \right\|_2 = \left\| H^T (b \ A) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & Z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ -y \end{pmatrix} \right\|_2 \\ &= \left\| (H^T b \ H^T A Z) \begin{pmatrix} 1 \\ -y \end{pmatrix} \right\|_2 \end{aligned}$$

Bidiagonales Problem der kleinsten Quadrate

Mit $h_1 = \beta_1 c_1$ und $W = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & Z \end{pmatrix}$ können wir folgendes erreichen :

$$H^T C W = H^T (b \ A) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & Z \end{pmatrix} = (H^T b \ H^T A Z) = \begin{pmatrix} \beta_1 e_1 & B \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

und damit unsere Norm umschreiben :

$$\begin{aligned} \|b - Ax\|_2 &= \left\| (b \ A) \begin{pmatrix} 1 \\ -x \end{pmatrix} \right\|_2 = \left\| H^T (b \ A) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & Z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ -y \end{pmatrix} \right\|_2 \\ &= \left\| (H^T b \ H^T A Z) \begin{pmatrix} 1 \\ -y \end{pmatrix} \right\|_2 = \|\beta_1 e_1 - By\|_2. \end{aligned}$$

Lanczos-Golub-Kahan Bidiagonalisierung

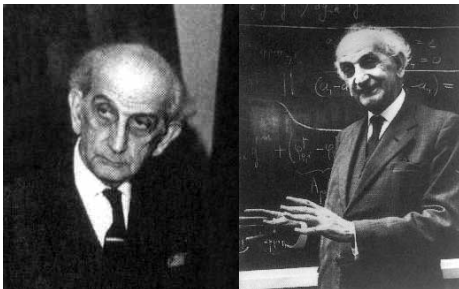


Abbildung: Lanczos, Cornelius 1893 - 1974.

Quelle : <http://www-history.mcs.st-andrews.ac.uk/PictDisplay/Lanczos.html>

Lanczos-Golub-Kahan Bidiagonalisierung

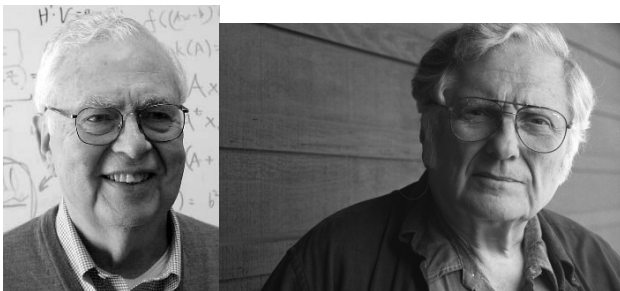


Abbildung: Golub, Gene Howard 1932 - 2007. Kahan, William 1933 .

Quelle : <http://www-history.mcs.st-andrews.ac.uk/Biographies.html>,
<http://www.heidelberg-laureate-forum.org/blog/laureate/william-morton-kahan/>

Lanczos-Golub-Kahan Bidiagonalisierung

Aus $(H^T b \quad H^T A Z) = \begin{pmatrix} \beta_1 e_1 & B \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$ extrahieren wir :

$$H^T A = \begin{pmatrix} B Z^T \\ 0 \end{pmatrix}$$

Lanczos-Golub-Kahan Bidiagonalisierung

Aus $(H^T b \quad H^T A Z) = \begin{pmatrix} \beta_1 e_1 & B \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$ extrahieren wir :

$$H^T A = \begin{pmatrix} B Z^T \\ 0 \end{pmatrix}$$

Das nutzen wir aus um jede Spalte auszurechnen durch:

Lanczos-Golub-Kahan Bidiagonalisierung

Aus $(H^T b \quad H^T A Z) = \begin{pmatrix} \beta_1 e_1 & B \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$ extrahieren wir :

$$H^T A = \begin{pmatrix} B Z^T \\ 0 \end{pmatrix}$$

Das nutzen wir aus um jede Spalte auszurechnen durch:

$$A^T h_i = \beta_i z_{i-1} + \alpha_i z_i,$$

Lanczos-Golub-Kahan Bidiagonalisierung

Aus $(H^T b \quad H^T A Z) = \begin{pmatrix} \beta_1 e_1 & B \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$ extrahieren wir :

$$H^T A = \begin{pmatrix} B Z^T \\ 0 \end{pmatrix}$$

Das nutzen wir aus um jede Spalte auszurechnen durch:

$$A^T h_i = \beta_i z_{i-1} + \alpha_i z_i,$$

$$\Rightarrow \alpha_i z_i = A^T h_i + \beta_i z_{i-1}$$

Lanczos-Golub-Kahan Bidiagonalisierung

Aus $(H^T b \quad H^T A Z) = \begin{pmatrix} \beta_1 \mathbf{e}_1 & B \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$ extrahieren wir :

$$H^T A = \begin{pmatrix} B Z^T \\ 0 \end{pmatrix}$$

Das nutzen wir aus um jede Spalte auszurechnen durch:

$$A^T h_i = \beta_i z_{i-1} + \alpha_i z_i,$$

$$\Rightarrow \alpha_i z_i = A^T h_i + \beta_i z_{i-1}$$

und

$$A z_i = \alpha_i h_i + \beta_{i+1} h_{i+1}$$

Lanczos-Golub-Kahan Bidiagonalisierung

Aus $(H^T b \quad H^T A Z) = \begin{pmatrix} \beta_1 \mathbf{e}_1 & B \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$ extrahieren wir :

$$H^T A = \begin{pmatrix} B Z^T \\ 0 \end{pmatrix}$$

Das nutzen wir aus um jede Spalte auszurechnen durch:

$$A^T h_i = \beta_i z_{i-1} + \alpha_i z_i,$$

$$\Rightarrow \alpha_i z_i = A^T h_i + \beta_i z_{i-1}$$

und

$$A z_i = \alpha_i h_i + \beta_{i+1} h_{i+1}$$

$$\Rightarrow \beta_{i+1} h_{i+1} = A z_i - \alpha_i h_i$$

Lanczos-Golub-Kahan Bidiagonalisierung

Wir können einen rekursiven Algorithmus formulieren um α_i und β_i aufzustellen:

LGK Bidiagonalisierung

1. $\beta_1 h_1 = b, z_0 = 0$

Lanczos-Golub-Kahan Bidiagonalisierung

Wir können einen rekursiven Algorithmus formulieren um α_i und β_i aufzustellen:

LGK Bidiagonalisierung

1. $\beta_1 h_1 = b, z_0 = 0$
2. für $i = 1$ bis n tue :
$$\alpha_i z_i = A^T h_i + \beta_i z_{i-1}$$
$$\beta_{i+1} h_{i+1} = A z_i - \alpha_i h_i$$

Lanczos-Golub-Kahan Bidiagonalisierung

Wir können einen rekursiven Algorithmus formulieren um α_i und β_i aufzustellen:

LGK Bidiagonalisierung

1. $\beta_1 h_1 = b, z_0 = 0$
2. für $i = 1$ bis n tue :
 $\alpha_i z_i = A^T h_i + \beta_i z_{i-1}$
 $\beta_{i+1} h_{i+1} = A z_i - \alpha_i h_i$
3. ende

Lanczos-Golub-Kahan Bidiagonalisierung

Wir können einen rekursiven Algorithmus formulieren um α_i und β_i aufzustellen:

LGK Bidiagonalisierung

1. $\beta_1 h_1 = b, z_0 = 0$
2. für $i = 1$ bis n tue :
 $\alpha_i z_i = A^T h_i + \beta_i z_{i-1}$
 $\beta_{i+1} h_{i+1} = A z_i - \alpha_i h_i$
3. ende

Die Koeffizienten α_{i-1} und β_i werden so aufgestellt, dass $\|h_i\| = \|z_i\| = 1$.

Bidiagonalisierung → Norm

**Was bringt uns die Bidiagonalisierung
für unser Residuum (unsere Norm) ?**

Bidiagonalisierung → Norm

Wir können die Norm während der Bidiagonalisierung berechnen :

$$(B_{k+1} \quad \beta e_1) = \begin{pmatrix} \alpha_1 & & & & & \beta_1 \\ \beta_2 & \alpha_2 & & & & 0 \\ & \beta_3 & \alpha_3 & & & 0 \\ & & \ddots & \ddots & & 0 \\ & & & \beta_k & \alpha_k & 0 \\ & & & & \beta_{k+1} & 0 \end{pmatrix}$$

Die β_i lassen sich mit Rotationen $\cos c_1$ und $\sin s_1$ eliminieren.

Bidiagonalisierung → Norm

Das finale Resultat nach k Schritten :

$$\begin{pmatrix} \hat{\alpha}_1 & + & & & \gamma_0 \\ & \hat{\alpha}_2 & + & & \gamma_1 \\ & & \hat{\alpha}_3 & + & \gamma_2 \\ & & \ddots & \ddots & \vdots \\ & & & \hat{\alpha}_k & \gamma_{k-1} \\ & & & & \gamma_k \end{pmatrix} =: \begin{pmatrix} \hat{B}_k & \gamma \\ 0 & \gamma_k \end{pmatrix}$$

Bidiagonalisierung → Norm

Das finale Resultat nach k Schritten :

$$\begin{pmatrix} \hat{\alpha}_1 & + & & & \gamma_0 \\ & \hat{\alpha}_2 & + & & \gamma_1 \\ & & \hat{\alpha}_3 & + & \gamma_2 \\ & & \ddots & \ddots & \vdots \\ & & & \hat{\alpha}_k & \gamma_{k-1} \\ & & & & \gamma_k \end{pmatrix} =: \begin{pmatrix} \hat{B}_k & \gamma \\ 0 & \gamma_k \end{pmatrix}$$

mit $\gamma_i = (-1)^i \beta_1 s_1 \cdots s_i$, $\gamma = (\gamma_0 \ \dots \ \gamma_{k-1})^T$ und den Rotationen als Orthogonalmatrix Q_{k+1} haben wir eine QR-Zerlegung :

$$B_{k+1} = Q_{k+1} \begin{pmatrix} \hat{B}_k \\ 0 \end{pmatrix}$$

Bidiagonalisierung → Norm

Diese führt zu unserer Norm :

$$\|B_{k+1}y - \beta_1 e_1\|_2^2 = \|\hat{B}_k y - \gamma\|_2^2 + |\gamma_k|^2$$

und damit ist die Norm unseres Residuums :

$$|\gamma_k| = |\beta_1 s_1 \cdots s_k|$$

und wir können die Norm im LGK - Algorithmus mitberechnen.

Zusammenfassung

Was wir heute gelernt haben:

- Reduzierter Rang = AZ_k

Zusammenfassung

Was wir heute gelernt haben:

- Reduzierter Rang = AZ_k
- Abgeschnittene Singulärwertzerlegung

$$\Rightarrow \text{Lösung : } x_k := \sum_{i=1}^k \frac{u_i^T b}{\sigma_i} v_i$$

Zusammenfassung

Was wir heute gelernt haben:

- Reduzierter Rang = AZ_k
- Abgeschnittene Singulärwertzerlegung
 $\Rightarrow$ Lösung : $x_k := \sum_{i=1}^k \frac{u_i^T b}{\sigma_i} v_i$
- Bidiagonalisierung mit Lanczos-Golub-Kahan

Zusammenfassung

Was wir heute gelernt haben:

- Reduzierter Rang = AZ_k
- Abgeschnittene Singulärwertzerlegung
 $\Rightarrow$ Lösung : $x_k := \sum_{i=1}^k \frac{u_i^T b}{\sigma_i} v_i$
- Bidiagonalisierung mit Lanczos-Golub-Kahan
- Residuum rekursiv berechenbar.

Weitere Literatur



L. Eldén:

Matrix methods in data mining and pattern recognition.

Volume 4, Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM), Philadelphia, PA, , 2007.

Weitere Literatur



L. Eldén:

Matrix methods in data mining and pattern recognition.

Volume 4, Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM), Philadelphia, PA, , 2007.



<http://www-history.mcs.st-andrews.ac.uk>
(letzter Besuch 28.11.2015)

Weitere Literatur



L. Eldén:

Matrix methods in data mining and pattern recognition.

Volume 4, Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM), Philadelphia, PA, , 2007.



<http://www-history.mcs.st-andrews.ac.uk>
(letzter Besuch 28.11.2015)



<http://www.heidelberg-laureate-forum.org/blog/laureate/william-morton-kahan/> (letzter Besuch : 30.11.2015)



**THANK YOU
FOR
YOUR
ATTENTION!
ANY QUESTIONS?**